



RECONHECIMENTO DE PADRÕES APLICADO NA ANÁLISE DE BIOFILMES POR ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO

Leonardo Silva Santos Lapa¹, Yago Ribeiro de Oliveira Silva¹, Priscila Ferreira de Sales²

⁽¹⁾ Bolsista de Iniciação Científica (PIBIC) – FAPEMIG / IFMG Campus Bambuí

⁽²⁾ Instituto Federal de Minas Gerais (IFMG) - Campus Bambuí

leonardo_lapa@yahoo.com.br, yago-180@hotmail.com,
priscila.sales@ifmg.edu.br

RESUMO

Como forma de amenizar os impactos ambientais, a substituição dos plásticos convencionais pelos biodegradáveis vem ganhando destaque nos últimos anos. Nesse sentido, o estudo propôs a análise comparativa de biofilmes e de seus precursores (amido de milho, extrato de própolis-verde e glicerina) empregando o reconhecimento de padrões, cuja ferramenta quimiométrica foi aplicada aos dados provenientes da caracterização por Espectroscopia na região do Infravermelho com Transformada de Fourier acoplada à técnica de Reflectância Total Atenuada (FTIR-ATR). Os filmes foram produzidos por meio da técnica de *casting*, em que foi aplicado um Planejamento Fatorial Completo com um Ponto Central. Os resultados revelaram que duas componentes principais foram capazes de reter 99,91% das informações, sendo possível verificar que o biofilme no qual foi empregada uma maior quantidade dos três componentes utilizados apresentou menor similaridade quando comparado aos demais. A análise de componentes hierárquicos (HCA) foi aplicada aos dados provenientes da análise de componentes principais (PCA) e através da construção de um dendrograma observou-se que todos os precursores apresentaram similaridade com algum dos biofilmes que foram sintetizados, o que justifica a importância de cada componente para a obtenção de biofilmes com características desejáveis.

PALAVRAS-CHAVE: Infravermelho. HCA. PCA.

INTRODUÇÃO

Os biofilmes são materiais finos e flexíveis produzidos a partir de polímeros naturais, podendo ser comestíveis ou não. A elaboração desse tipo de material em nível laboratorial envolve a inserção de três componentes: um agente formador do filme, um solvente e um plastificante, em que cada um tem sua finalidade específica. A combinação



resultante da interação entre os componentes é capaz de formar uma estrutura contínua por meio de interações entre as moléculas, sob ação de um tratamento físico ou químico (ARAÚJO, 2007).

A espectroscopia na região do Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR) tem uma larga faixa de aplicações que vai desde a análise de moléculas pequenas até sistemas complexos como células e tecidos. Essa espectroscopia vibracional sofreu grandes avanços visto que os espectrômetros de infravermelho são facilmente encontrados na maioria dos laboratórios de pesquisa, pela possibilidade de usar amostras em estado sólido amorfo ou cristalino, soluções aquosas, solventes orgânicos, filmes e algumas membranas (BERTHOMIEU e HIENERWADEL, 2009).

Deve-se levar em consideração que a extração de informações dos dados desse tipo de análise envolve um número elevado de variáveis e o reconhecimento de padrões torna-se então necessário na medida em que a PCA reduz o número de dimensões do conjunto de dados sem a perda das informações relevantes. Já a HCA pode auxiliar na interpretação dos dados amostrais, uma vez que vincula diferentes amostras por meio da construção de um dendrograma contendo o índice de similaridade das amostras (LOPES et al., 2010).

Neste contexto, o presente estudo tem o intuito de empregar o reconhecimento de padrões na análise de Infravermelho dos biofilmes e seus precursores.

METODOLOGIA

Com o intuito de avaliar o efeito dos parâmetros: massa de amido (X_1)- (variação de 3 gramas a 5 gramas), massa percentual de glicerina (X_2)- (variação percentual de 0,4 a 1) e quantidade percentual de extrato de própolis-verde (X_3)- (variação entre 0,1 e 0,2) na preparação dos filmes, os experimentos foram conduzidos empregando o Planejamento Fatorial Completo com Ponto Central. Esse tipo de delineamento envolveu 2^3 pontos fatoriais e 1 ponto central, em que o número total de experimentos foi de 9. Foi utilizada a metodologia de casting com adaptações (VEIGA-SANTOS, 2007).

Os biofilmes sintetizados foram caracterizados por FTIR-ATR, utilizando uma faixa espectral compreendida entre 4000 e 400 cm^{-1} , resolução de 4 cm^{-1} e 64 scans, utilizando o equipamento Varian 660. As análises foram conduzidas na Central de Análises e Prospecção Química (CAPQ) da Universidade Federal de Lavras. Para as análises de reconhecimento de padrões foi empregado o programa Chemoface versão 1.5.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram conduzidas as análises de Espectroscopia na região do Infravermelho (Figura 1) com Transformada de Fourier com o objetivo de verificar se realmente houve a incorporação dos três componentes precursores em todas as condições de síntese dos biofilmes.

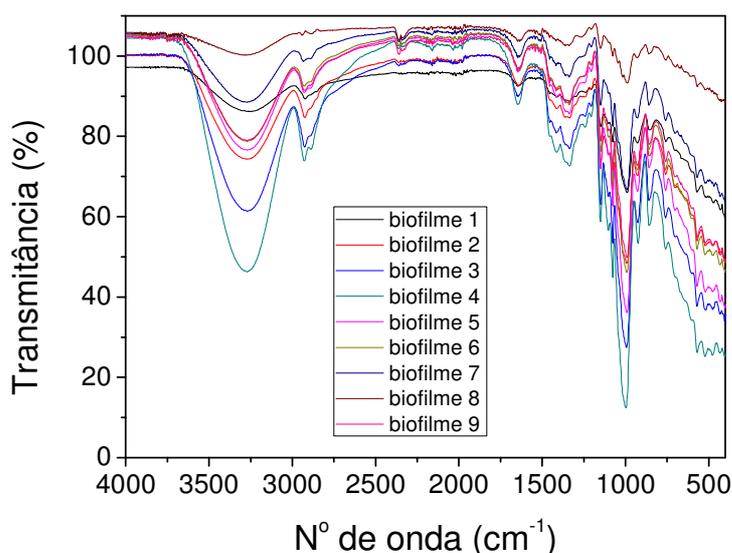


Figura 1- Espectros de Infravermelho Médio dos biofilmes sintetizados

A análise da Figura 1 revela que os biofilmes apresentaram similaridade entre si e que todos os biofilmes possuem bandas e/ou picos característicos dos três precursores empregados durante a síntese: agente formador (amido de milho) ($3262,93\text{ cm}^{-1}$; $1338,34\text{ cm}^{-1}$; $1143,57\text{ cm}^{-1}$ e $860,09\text{ cm}^{-1}$), plastificante (glicerina) ($2938,50\text{ cm}^{-1}$; $2884,08\text{ cm}^{-1}$, $1415,61\text{ cm}^{-1}$ e $911,70\text{ cm}^{-1}$) e aditivo (extrato de própolis-verde) ($1645,58\text{ cm}^{-1}$ e $1043,45\text{ cm}^{-1}$). Tais resultados permitem inferir que a combinação dos três fatores se mostra satisfatória em todas as condições empregadas, justificando a inserção dos três componentes para a obtenção de filmes com propriedades e características desejáveis. Entretanto, vale salientar que os espectros apresentaram discrepâncias no que se refere à intensidade das bandas, sendo, portanto necessário o emprego do reconhecimento de padrões para analisar minuciosamente e comparativamente os biofilmes e os precursores.

Aplicação da análise de reconhecimento de padrões- PCA e HCA



O gráfico de escores (Figura 2 a) mostrou que as duas primeiras componentes principais explicaram juntas 99,91 % da variabilidade dos dados. Pela componente principal 1, a qual retém uma maior quantidade de informações, as amostras sintetizadas nas condições 1, 7 e 8 foram as que apresentam menor similaridade.

De acordo com os resultados oriundos dos dados da PCA que não passaram por pré-processamento, foi obtido um dendrograma para a análise de componentes hierárquicos (HCA) (Figura 2 b), onde as amostras foram organizadas no eixo x e o índice de similaridade no eixo y, sendo que as amostras foram incluídas em função de sua proximidade. Para tanto, foram empregadas duas componentes principais, distância Euclideana e a ligação das amostras pelo vizinho mais próximo.

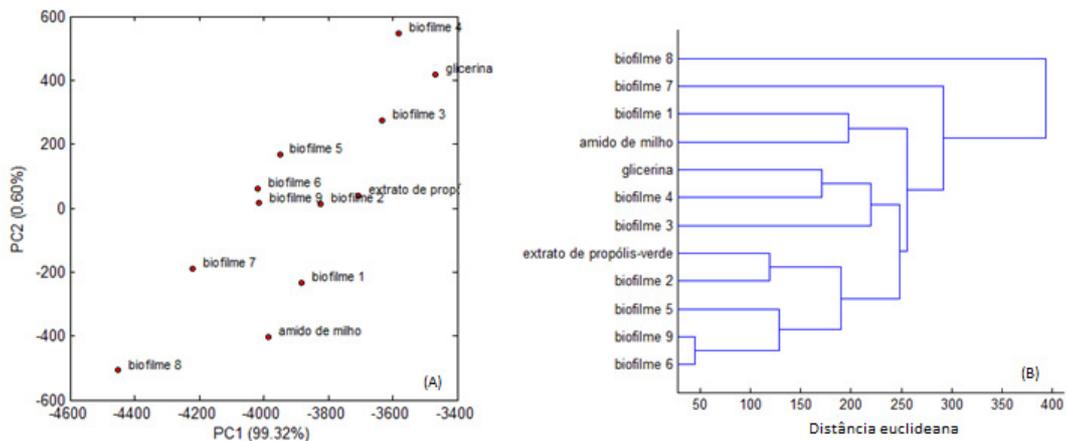


Figura 2- a) Gráfico de escores da PCA b) dendrograma da HCA

A análise do dendrograma revela que os biofilmes dos ensaios 6 e 9 são os que apresentaram maior similaridade, sendo que o biofilme 5 formou um novo grupo com as duas primeiras amostras. Estes resultados permitem evidenciar que a quantidade de própolis-verde não influenciou de maneira significativa na análise descrita. Verifica-se ainda que o biofilme 2 foi o mais similar ao extrato de própolis-verde. O fenômeno está relacionado ao fato de o ensaio experimental conter uma menor quantidade de amido de milho e glicerina e uma maior quantidade percentual de glicerina. Por outro lado, verifica-se que o biofilme 4 é o que mais se assemelha à glicerina, o que supostamente está relacionado ao fato da síntese nessa condição apresentar menor teor de amido de milho e maior quantidade do plastificante. A inserção dos biofilmes 3 e 4 num mesmo grupo evidenciam mais uma vez que o extrato de própolis-verde não foi um fator determinante



para essa análise. Por fim verifica-se que os biofilmes cujas sínteses são descritas pelos ensaios 1, 7 e 8 foram os quais mais se diferiram das demais amostras, podendo-se reportar que as condições nas quais se empregam as quantidades mínimas e máximas dos três componentes faz com que os resultados sejam mais distintos com relação à análise descrita.

CONCLUSÕES

A análise dos dados revelou que dentre os biofilmes produzidos, o que apresentou menor similaridade foi o sintetizado empregando maiores quantidades dos precursores. Pode-se concluir que o reconhecimento de padrões aplicado a biofilmes de baixo custo fez com que o trabalho apresentasse relevância no âmbito científico e tecnológico na medida em que utilizou ferramentas quimiométricas na síntese e na análise dos materiais produzidos. Levando em consideração o tema da Semana Nacional de Ciência e Tecnologia, ressalta-se a importância deste trabalho, uma vez que a técnica de caracterização utilizada é de rápida aquisição de dados, em que não requer preparação destrutiva da amostra, contando ainda com a simplicidade no procedimento de medida. Pode-se ainda inferir que a análise multivariada aplicada aos dados permite a facilidade de interpretação dos resultados, uma vez que uma quantidade enorme de variáveis de partida foram reduzidas àquelas nas quais se concentram uma maior quantidade de informações (componentes principais). De um modo geral verifica-se a diminuição da desigualdade pela associação entre uma técnica simples, cuja análise paga é economicamente viável a biofilmes produzidos com materiais de baixo custo e ambientalmente favoráveis.

REFERÊNCIAS

- ARAÚJO, Y. L. F. M. **Uso de biofilme de amido à base de própolis vermelha para a conservação de folhas de alface (*Lactuca sativa*)**. Scientia Plena 8, 2012.
- BERTHOMIEU, C.; HIENERWADEL, R. **Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy**. Photosynth. Res., [S. l.], v. 101, n. 2-3, p. 157-170, 2009.
- LOPES, R. E. C.; SANTOS, I. P. dos; SOARES, L. F.; PEREIRA, E. F.; BRAGA, J. W. B. **Aplicação da Análise por Componentes Principais (PCA) na identificação de marcas de canetas esferográficas - uma introdução à quimiometria**. In: XV ENCONTRO NACIONAL DE ENSINO DE QUÍMICA (XV ENEQ), 2010, Brasília.
- VEIGA-SANTOS, P.; OLIVEIRA, L. M.; CEREDA, M. P.; ALVES, A. J.; SCAMPARINI, A. R. P. **Mechanical Properties, Hydrophilicity and Water Activity of Starch-Gum Films: Effects of Additives and Deacetylated Xanthan Gum**. Food Hydrocolloids, v. 19, p. 341-349, 2007.